

*Шаповалова А. С., Парфёнов С. Ю., Соболев А. М.*

## **РАСЧЕТ ИЗЛУЧЕНИЯ $\text{H}_2\text{CO}$ С УЧЕТОМ УРОВНЕЙ ВОЗБУЖДЕННЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ В МАССИВНЫХ АККРЕЦИОННЫХ ДИСКАХ**

*Аннотация.* Высокие температуры газа и интенсивное излучение в аккреционных дисках вокруг массивных звезд могут приводить к возбуждению нижних вращательных уровней возбужденных колебательных состояний  $\text{H}_2\text{CO}$ , что, в свою очередь, может влиять на интенсивность вращательных радио-переходов.

Целью данной работы являлось создание модели молекулярных вращательных уровней и переходов основных и возбужденных колебательных состояний  $\text{H}_2\text{CO}$  (далее основных и возбужденных уровней, соответственно) и на основе созданной модели провести расчет переноса излучения в линиях  $\text{H}_2\text{CO}$  в аккреционных дисках.

Предварительные результаты показали, что учет возбужденных уровней может существенно повлиять на оптическую толщину во вращательных переходах. При одних и тех же физических условиях учет возбужденных уровней может приводить к мазерному усилению.

*Ключевые слова:* моделирование, перенос излучения, нейронные сети, спектроскопия, космические мазеры, молодые звездные объекты, аккреционные диски.

*Abstract.* A high gas temperature and intense radiation field, which are present in accretion disks around massive stars, can lead to excitation of rotational levels of lower  $\text{H}_2\text{CO}$  excited vibrational states, thus affecting the intensity of rotational radio-transitions.

The aim of this work is to make a model of molecular rotational levels and transitions of  $\text{H}_2\text{CO}$  ground and excited vibrational states (hereafter, ground and excited levels, respectively) and to use this model for radiative transfer calculations in  $\text{H}_2\text{CO}$  lines in accretion discs.

Preliminary results showed that the inclusion of levels from excited vibrational states could significantly affect the optical thickness in rotational transitions. Under the same physical conditions, the inclusion of excited levels into molecular model could lead to maser amplification.

*Keywords:* modelling, radiative transfer, neural network, spectroscopy, cosmic masers, young stellar objects, accretion discs.

Ранние расчеты переноса излучения для формальдегида ( $\text{H}_2\text{CO}$ ) показали, что яркого мазерного излучения в условиях, характерных для

областей звездообразования, наблюдаться не будет [1]. При этом, в расчетах переноса излучения  $\text{H}_2\text{CO}$  учитывались лишь вращательные уровни основного колебательного состояния (основные уровни). Однако, в условиях аккреционных дисков вокруг массивных звезд при высоких температурах и интенсивном излучении возможно возбуждение нижних вращательных уровней возбужденных колебательных состояний (возбужденных уровней)  $\text{H}_2\text{CO}$ , что может влиять на интенсивность вращательных радио-переходов.

Целью работы было создание модели молекулярных уровней и переходов  $\text{H}_2\text{CO}$  с учетом уровней первых возбужденных колебательных состояний и расчет переноса излучения в линиях  $\text{H}_2\text{CO}$  в массивных аккреционных дисках.

Для расчетов использовались молекулярные данные (энергии уровней, статистические веса, квантовые числа и коэффициенты Эйнштейна), которые были взяты из базы ExoMol [2]. На основе этих данных были выбраны основные и возбужденные уровни с энергиями до  $1000$  и  $1500 \text{ см}^{-1}$ , соответственно. При этом выбирались только такие возбужденные уровни, которые связаны с основными радиоактивными переходами.

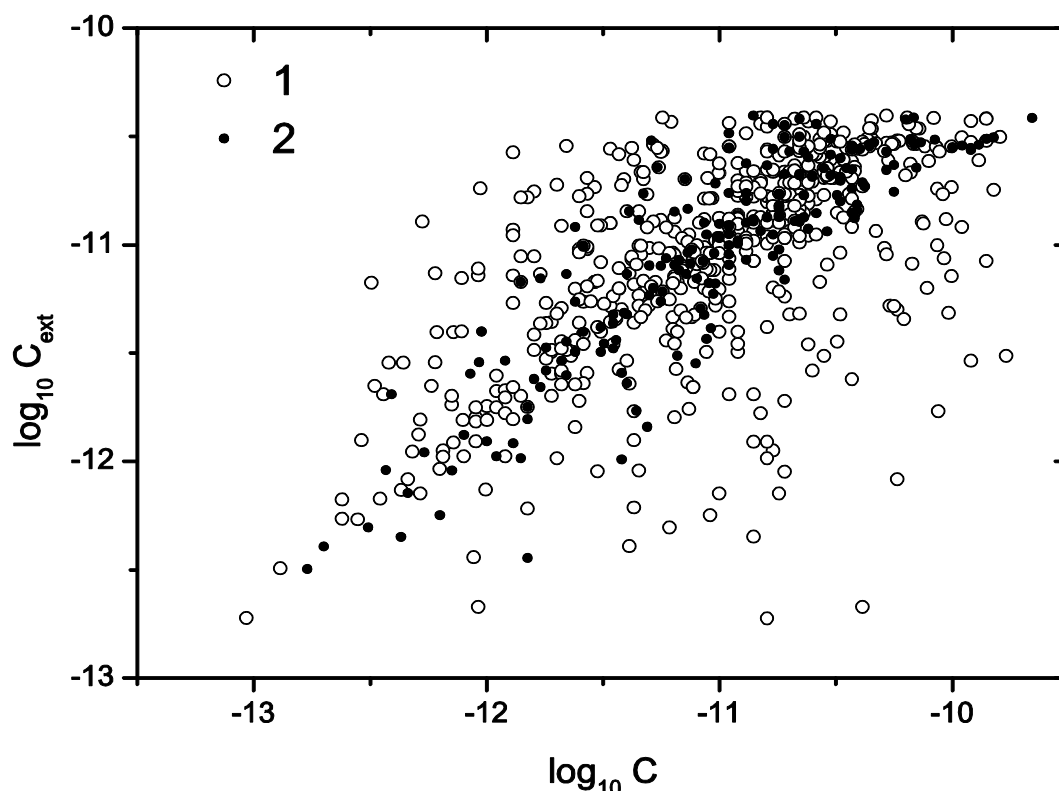


Рис. 1. Результат обучения нейронной сети. Соотношение действительных значений коэффициентов столкновительных переходов ( $C$ ) и рассчитанных с помощью нейронных сетей ( $C_{\text{ext}}$ ). 1 – обучающая выборка, 2 – тестовая выборка. Коэффициенты даны в  $\text{см}^3/\text{с}$

Оценки скоростей столкновительных переходов, которые включают возбужденные состояния были получены экстраполяцией с помощью нейронной сети (НС) [3] по набору уже известных скоростей столкновительных переходов между уровнями основного состояния [4]. Обучение НС проводилось на подмножестве переходов, для которых известны скорости столкновительных переходов, и последующее тестирование проводилось с использованием другого подмножества переходов. Результаты обучения НС представлены на рисунке 1. НС состояла из трех слоев: входной, скрытый и выходной, включающих три, шестнадцать и один нейрон, соответственно. Входными параметрами были разности энергий и двух вращательных квантовых чисел – квантовые числа полного углового момента и проекции углового момента на одну из осей симметрии – между начальным и конечным состояниями данного перехода. Относительная точность расчетов при использовании НС составляет 0,1.

Полученная модель уровней и переходов затем использовалась для расчета переноса излучения в линиях  $\text{H}_2\text{CO}$  в приближении большого градиента скорости. Для расчетов использовалась ранее опубликованная модель аккреционного диска вокруг массивной двойной звезды, которая была предложена для объяснения периодической переменности мазеров метанола, ассоциирующихся с областями массивного звездообразования [5].

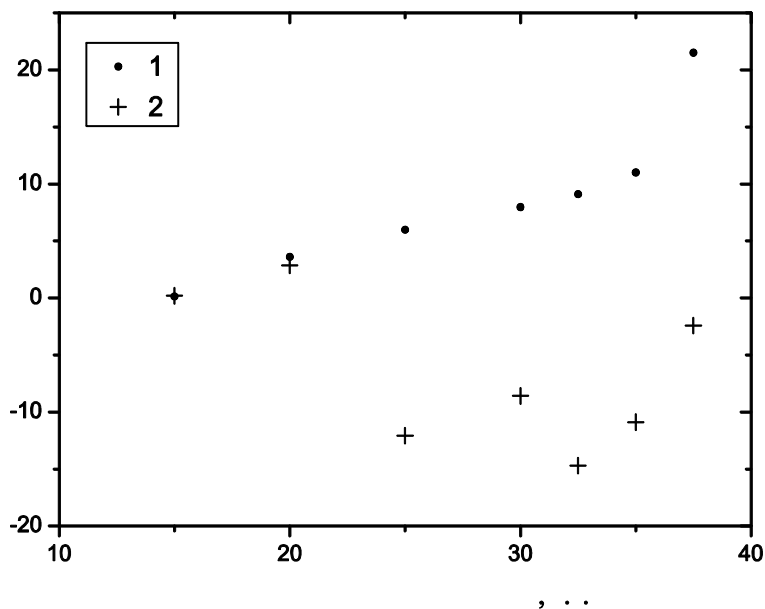


Рис. 2. Результат расчета переноса излучения в линии на 4,8 ГГц. Значение оптической толщины в зависимости от расстояния от центра диска. 1 – с учетом только основных уровней, 2 – с учетом основных и возбужденных уровней

Нами были рассмотрены линии, соответствующие переходам  $1_{10}-1_{11}$  (4,8 ГГц),  $2_{11}-2_{12}$  (14,5 ГГц),  $3_{12}-3_{13}$  (28,9 ГГц) и  $4_{13}-4_{14}$  (48,3 ГГц).

В результате было получено, что:

- учет возбужденных уровней может существенно повлиять на оптическую толщину в рассмотренных вращательных переходах (рис. 2);
- при одних и тех же физических условиях учет вращательных уровней возбужденных колебательных состояний может приводить к смене знака оптической толщины с положительного на отрицательный, то есть к мазерному усилению.

**Благодарность:** Работа выполнялась в Уральском федеральном университете при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 15-12-10017).

### **Библиография**

1. van der Walt D. J. Pumping of the 4.8 GHz H<sub>2</sub>CO masers and its implications for the periodic masers in G37.55+0.20 // *Astronomy & Astrophysics* – 2014. – Vol. 562. – P. A68. DOI: 10.1051/0004-6361/201322512.

2. Al-Refaie A. F., Yachmenev A., et al. ExoMol line lists - VIII. A variationally computed line list for hot formaldehyde // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* – 2015. – Vol. 448. – P. 1704-1714. DOI: 10.1093/mnras/stv091.

3. Neufeld D. A. Rate Coefficients for the Collisional Excitation of Molecules: Estimates from an Artificial Neural Network // *The Astrophysical Journal* – 2010. – Vol. 708. – P. 635-644. DOI: 10.1088/0004-637X/708/1/635.

4. Wiesenfeld L., Faure A. Rotational quenching of H<sub>2</sub>CO by molecular hydrogen: cross-sections, rates and pressure broadening // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* – 2013. – Vol. 432. – P. 2573-2578. DOI: 10.1093/mnras/stt616.

5. Parfenov S.Yu., Sobolev A.M. On the Class II methanol maser periodic variability due to the rotating spiral shocks in the gaps of discs around young binary stars // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* – 2014. – Vol. 444. – P. 620-628. DOI: 10.1093/mnras/stu1481.